(19)日本国特許庁(JP)　(12)特　許　公　報(B2)　(11)特許番号
特許第5547189号
(P5547189)
(45)発行日　平成26年7月9日(2014.7.9)　(24)登録日　平成26年5月23日(2014.5.23)

(51)Int.Cl.　　　　　　　　　　F I
H01L 51/46 (2006.01)　　H01L 31/04 152D

請求項の数 37 (全 27 頁)

(21)出願番号　特願2011-522084 (P2011-522084)
(86)(22)出願日　平成21年7月6日 (2009.7.6)
(65)公表番号　特表2011-530808 (P2011-530808A)
(43)公表日　平成23年12月22日 (2011.12.22)
(86)国際出願番号　PCT/US2009/049701
(87)国際公開番号　WO2010/016986
(87)国際公開日　平成22年2月11日 (2010.2.11)
審査請求日　平成24年7月6日 (2012.7.6)
(31)優先権主張番号　61/086,977
(32)優先日　平成20年8月7日 (2008.8.7)
(33)優先権主張国　米国 (US)

(73)特許権者　308014846
メルク　パテント　ゲーエムベーハー
ドイツ国　６４２９３　ダルムシュタット，フランクフルター　シュトラーセ　２５０
(74)代理人　100068755
弁理士　恩田　博宣
(74)代理人　100105957
弁理士　恩田　誠
(74)代理人　100142907
弁理士　本田　淳
(72)発明者　ジュ、ジェングオ
アメリカ合衆国　０１８２４　マサチューセッツ州　チェムスフォード　ミーハン　ドライブ　８

最終頁に続く

(54)【発明の名称】新規な光活性コポリマー並びに同コポリマーを含む物品及びシステム

(57)【特許請求の範囲】

【請求項１】

第１電極と、

第２電極と、

第１電極と第２電極との間に位置する光活性材料とを備える物品であって、前記光活性材料は、第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むポリマーを含有し、第１コモノマー繰り返し単位はシラシクロペンタジチオフェン部分を含み、第２コモノマー繰り返し単位はシクロペンタジチオフェン部分を含み、第３コモノマー繰り返し単位はベンゾチアジアゾール部分を含み、

前記物品は光起電力セルとして構成されている、物品。

【請求項２】

第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、多くとも５：１である、請求項１に記載の物品。

【請求項３】

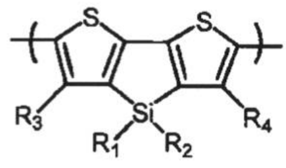
第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、少なくとも１：１である、請求項１に記載の物品。

【請求項４】

第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、３：１である、請求項１に記載の物品。

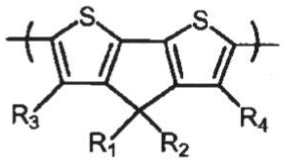
【請求項５】

第１コモノマー繰り返し単位は式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分を含み、
【化１】



(1),

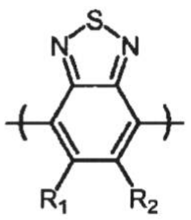
前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Ｒであり、ＲはＨ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3〜C_{20}シクロアルキルまたはC_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキルである、請求項１に記載の物品。
【請求項６】
R_1およびR_2の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、またはヘテロアリールである、請求項５に記載の物品。
【請求項７】
R_1およびR_2の各々は、独立して、C_1〜C_{20}アルキルである、請求項６に記載の物品。
【請求項８】
R_1およびR_2の各々は２－エチルヘキシルである、請求項７に記載の物品。
【請求項９】
第２コモノマー繰り返し単位は式（２）のシクロペンタジチオフェン部分を含み、
【化２】



(2),

前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Ｒであり、ＲはＨ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3〜C_{20}シクロアルキルまたはC_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキルである、請求項１に記載の物品。
【請求項１０】
R_1およびR_2の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、またはヘテロアリールである、請求項９に記載の物品。
【請求項１１】
R_1およびR_2の各々は独立して、C_1〜C_{20}アルキルである、請求項１０に記載の物品。
【請求項１２】
R_1およびR_2の各々は２－エチルヘキシルである、請求項１１に記載の物品。
【請求項１３】
第３コモノマー繰り返し単位は式（３）のベンゾチアジアゾール部分を含み、

【化３】



(3),

前記式中、Ｒ$_1$およびＲ$_2$の各々は、独立して、Ｈ、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルコキシ、Ｃ$_3$～Ｃ$_{20}$シクロアルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはＳＯ$_2$Ｒであり、ＲはＨ、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、Ｃ$_3$～Ｃ$_{20}$シクロアルキルまたはＣ$_1$～Ｃ$_{20}$ヘテロシクロアルキルである、請求項１に記載の物品。

【請求項１４】

Ｒ$_1$およびＲ$_2$の各々は、独立して、Ｈである、請求項１３に記載の物品。

【請求項１５】

前記ポリマーは電子供与体材料である、請求項１に記載の物品。

【請求項１６】

前記物品は電子受容体材料をさらに含む、請求項１５に記載の物品。

【請求項１７】

前記電子受容体材料は、フラーレン、無機ナノ粒子、オキサジアゾール、ディスコティック液晶、炭素ナノロッド、無機ナノロッド、ＣＮ基を含有するポリマー、ＣＦ$_3$基を含有するポリマーおよびそれらの組み合わせのうちから選択される材料を含む、請求項１６に記載の物品。

【請求項１８】

前記電子受容体材料は置換フラーレンを含有する、請求項１７に記載の物品。

【請求項１９】

前記置換フラーレンはＣ６１－ＰＣＢＭまたはＣ７１－ＰＣＢＭを含む、請求項１８に記載の物品。

【請求項２０】

前記物品は、ＡＭ１．５の条件下で、少なくとも４の効率を有する、請求項１に記載の物品。

【請求項２１】

前記物品は、ＡＭ１５の条件下で、少なくとも５の効率を有する、請求項１に記載の物品。

【請求項２２】

第１電極および第２電極と、

第１電極と第２電極との間に位置する第１光活性層および第２光活性層とを備えるシステムであって、第１光活性層および第２光活性層の少なくとも一方は、第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むポリマーを含有し、第１コモノマー繰り返し単位はシラシクロペンタジチオフェン部分を含み、第２コモノマー繰り返し単位はシクロペンタジチオフェン部分を含み、第３コモノマー繰り返し単位はベンゾチアジアゾール部分を含み、

前記システムは光起電力システムとして構成されている、システム。

【請求項２３】

前記システムは、タンデム型光起電力セルを備える、請求項２２に記載のシステム。

【請求項２４】

第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むポリマーであって、第１コモノマー繰り返し単位はシラシクロペンタジ

チオフェン部分を含み、第２コモノマー繰り返し単位はシクロペンタジチオフェン部分を含み、第３コモノマー繰り返し単位はベンゾチアジアゾール部分を含む、ポリマー。

【請求項２５】

第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、多くとも５：１である、請求項２４に記載のポリマー。

【請求項２６】

第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、少なくとも１：１である、請求項２４に記載のポリマー。

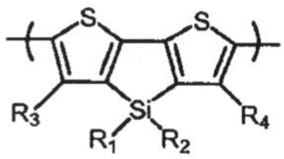
【請求項２７】

第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、３：１である、請求項２４に記載のポリマー。

【請求項２８】

第１コモノマー繰り返し単位は式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分を含み、

【化４】



(1),

前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり、ＲはＨ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキル、またはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである、請求項２４に記載のポリマー。

【請求項２９】

R_1およびR_2の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、またはヘテロアリールである、請求項２８に記載のポリマー。

【請求項３０】

R_1およびR_2の各々は、独立して、C_1～C_{20}アルキルである、請求項２９に記載のポリマー。

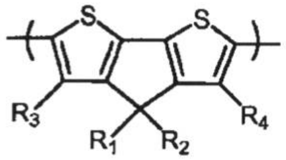
【請求項３１】

R_1およびR_2の各々は２－エチルヘキシルである、請求項３０に記載のポリマー。

【請求項３２】

第２コモノマー繰り返し単位は式（２）のシクロペンタジチオフェン部分を含み、

【化５】



(2),

前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり、ＲはＨ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである、請求項２４に記載のポリマー。

【請求項３３】

R_1およびR_2の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコ

キシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、またはヘテロアリールである、請求項３２に記載のポリマー。

【請求項３４】

R_1およびR_2の各々は、独立して、C_1～C_{20}アルキルである、請求項３３に記載のポリマー。

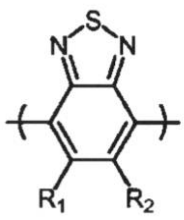
【請求項３５】

R_1およびR_2の各々は２－エチルヘキシルである、請求項３４に記載のポリマー。

【請求項３６】

第３コモノマー繰り返し単位は式（３）のベンゾチアジアゾール部分を含み、

【化６】



(3),

前記式中、R_1およびR_2の各々は、独立して、H、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、CN、OR、C（O）R、C（O）OR、またはSO_2Rであり、RはH、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである、請求項２４に記載のポリマー。

【請求項３７】

R_1およびR_2の各々は、独立して、Hである、請求項３６に記載のポリマー。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

この開示は、新規な光活性ポリマー、並びに関連する構成要素、物品、システムおよび方法に関する。

米国特許法第１１９条（ｅ）に準じて、本願は、２００８年８月７日に出願された米国仮出願番号第６１／０８６，９７７号に対して優先権を主張する。前記特許文献の内容は、参照により本願に援用される。

【背景技術】

【０００２】

光起電力セル（光電池）は、一般に、光の形のエネルギーを電力の形のエネルギーに転換するために用いられる。典型的な光起電力セルは、２つの電極間に配置された光活性材料を備える。一般に、光は電極の一方または双方を通過して光活性材料と相互作用することにより、電荷担体（すなわち電子および正孔）を生成する。その結果、光活性材料が光および一般電荷担体を吸収する能力は、光起電力セルの全体的な効率を制限する可能性がある。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【０００３】

この開示は、新規な光活性ポリマー、並びに関連する構成要素、物品、システムおよび方法に関する。

【課題を解決するための手段】

【０００４】

一態様において、この開示は、第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むポリマーを特徴とする。第１コモノマー

繰り返し単位はシラシクロペンタジチオフェン部分を含む。第２コモノマー繰り返し単位はシクロペンタジチオフェン部分を含む。第３コモノマー繰り返し単位はベンゾチアジアゾール部分を含む。

【０００５】

別の態様において、この開示は、第１電極と、第２電極と、第１電極と第２電極との間に位置する光活性材料とを備えた物品を特徴とする。前記光活性材料は上述したポリマーを含有する。前記物品は光起電力セルとして構成されている。

【０００６】

別の態様において、この開示は、第１電極と、第２電極と、第１電極と第２電極との間に位置する光活性材料とを備えた物品を特徴とする。前記光活性材料は、第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むポリマーを含有する。第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、多くとも約５：１である。前記物品は光起電力セルとして構成されている。

【０００７】

さらに別の態様において、この開示は、第１電極および第２電極と、第１電極と第２電極との間に位置する第１光活性層および第２光活性層とを備えたシステムを特徴とする。第１光活性層および第２光活性層の少なくとも一方は上述したポリマーを含有する。前記システムは光起電力システムとして構成されている。

【０００８】

実施形態は、以下の特徴の１つ以上を備え得る。

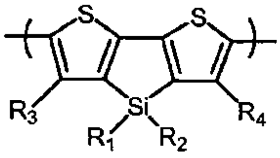
一部の実施形態において、第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、多くとも１０：１であり、かつ／または少なくとも１：１（例えば３：１約）である。

【０００９】

一部の実施形態において、第１コモノマー繰り返し単位は、式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分を含む。

【００１０】

【化１】



(1),

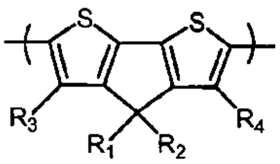
前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、H、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、CN、OR、C（O）R、C（O）OR、またはSO$_2$Rであり、RはH、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキル、またはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである。例えば、R_1およびR_2の各々は独立して、C_1～C_{20}アルキル（例えば２－エチルヘキシル）である。

【００１１】

一部の実施形態において、第２コモノマー繰り返し単位は、式（２）のシクロペンタジチオフェン部分を含む。

【００１２】

【化２】



(2),

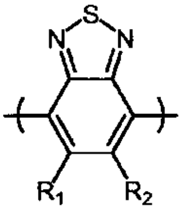
前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり、ＲはＨ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである。例えば、R_1およびR_2の各々は、独立して、C_1～C_{20}アルキル（例えば２－エチルヘキシル）である。

【００１３】

一部の実施形態において、第３コモノマー繰り返し単位は、式（３）のベンゾチアジアゾール部分を含む。

【００１４】

【化３】



(3),

前記式中、R_1およびR_2の各々は、独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり、ＲはＨ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである。例えば、R_1およびR_2の各々はＨである。

【００１５】

一部の実施形態において、前記物品は電子受容体材料をさらに含む。前記電子受容体材料としては、フラーレン、無機ナノ粒子、オキサジアゾール、ディスコティック液晶、炭素ナノロッド、無機ナノロッド、ＣＮ基を含有するポリマー、CF_3基を含有するポリマーおよびそれらの組み合わせのうちから選択される材料を挙げることができる。例えば、前記電子受容体材料としては、［６，６］－フェニルＣ６１－酪酸メチルエステル（Ｃ６１－ＰＣＢＭ）および［６，６］－フェニルＣ７１－酪酸メチルエステル（Ｃ７１－ＰＣＢＭ）のような置換フラーレンを挙げることができる。

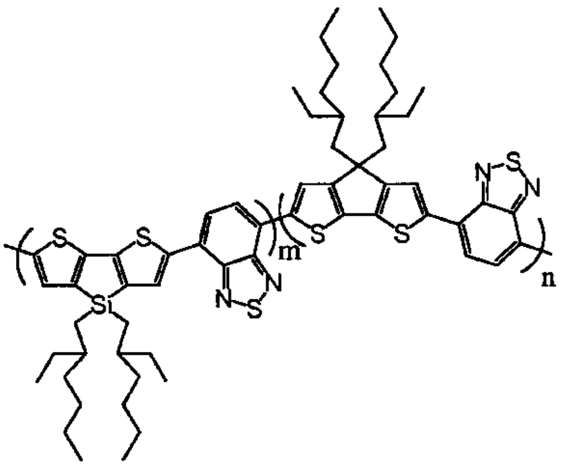
【００１６】

一部の実施形態において、前記物品は、ＡＭ１．５の条件下で、少なくとも約４％（例えば少なくとも約５％）の効率を有する。

一部の実施形態において、前記ポリマーは、

【００１７】

【化４】



であり得る。前記式中、ｍおよびｎの各々は独立して、１を超える整数である。

【００１８】

一部の実施形態において、前記ポリマーは電子供与体材料または電子受容体材料のいずれかであり得る。

一部の実施形態において、前記光起電力セルはタンデム型光起電力セルであり得る。

【００１９】

実施形態は、以下の利点の１つ以上を提供し得る。

理論によって縛られることを望むものではないが、光活性ポリマーにシラシクロペンタジチオフェン部分を組み込むことにより、ポリマーの可溶性および加工性、およびそのようなポリマーから調製された光活性層のモルフォロジーを著しく改善することができ、それにより光起電力セルの効率を増大させると考えられる。

【００２０】

理論によって縛られることを望むものではないが、光活性ポリマーにシラシクロペンタジチオフェン部分を組み込むことにより、ポリマーの吸収波長を、ほとんどの他のポリマーによっては到達することができない電磁スペクトルの赤色および近赤外ＩＲ部（例えば６５０～９００ｎｍ）に向かって偏移させることができると考えられる。そのようなコポリマーが光起電力セルに組み込まれると、該電池はスペクトルのこの領域の光を吸収することが可能となり、それにより該電池の電流および効率を増大させる。

【００２１】

理論によって縛られることを望むものではないが、本願に記載された第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含有する光活性ポリマーを有する光起電力セルは、高い効率を有すると考えられる。一部の実施形態において、そのような光起電力セルは、ＡＭ１．５の条件下で、少なくとも約４％（例えば少なくとも約５％、または少なくとも６％）の効率を有することができる。

【００２２】

理論によって縛られることを望むものではないが、本願に記載された第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含有する光活性ポリマーは、有機溶媒（例えばクロロベンゼン）中における改善された可溶性を有し、第１コモノマー繰り返し単位および第３コモノマー繰り返し単位、または第２コモノマー繰り返し単位および第３コモノマー繰り返し単位のみを含有するポリマーよりも増大した充填率および光電流を有する有機光起電力セルを提供すると考えられる。

【００２３】

理論によって縛られることを望むものではないが、本願に記載された光活性ポリマーの他の効果としては、光電流およびセル電圧を改善することができる適当なバンドギャップ（例えば１．４～１．６ｅＶ）、および光活性層における電荷分離を促進することができ

る高い正電荷移動性（例えば１０$^{-4}$～１０$^{-1}$　ｃｍ^{2}／Ｖｓ）を挙げることができると考えられる。

【００２４】

本発明の他の特徴および利点は、説明、図面および特許請求の範囲から明白になるであろう。

【図面の簡単な説明】

【００２５】

【図１】光起電力セルの実施形態の断面図。

【図２】タンデム型光起電力セルの実施形態の断面図。

【図３】電気的に直列に接続された多数の光起電力セルを含むシステムの概略図。

【図４】電気的に並列に接続された多数の光起電力セルを含むシステムの概略図。

【発明を実施するための形態】

【００２６】

様々な図面における同様の参照記号は類似の要素を示す。

図１は、基材１１０、電極１２０、任意の正孔ブロッキング層１３０、光活性層１４０（電子受容体材料および電子供与体材料を含有）、正孔キャリア層１５０、電極１６０および基材１７０を備えた光起電力セル１００の断面図を示している。

【００２７】

一般に、使用中において、光は基材１１０の表面に衝突し、基材１１０、電極１２０および任意の正孔ブロッキング層１３０を通過する。次いで、光は光活性層１４０と相互作用して、電子を電子供与体材料（例えば上述したポリマー）から電子受容体材料（例えばＣ６１－ＰＣＢＭ）に移動させる。次いで、電子受容体材料は電子を正孔ブロッキング層１３０を介して電極１２０に伝達し、電子供与体材料は正孔を正孔キャリア層１５０を介して電極１６０に移動させる。電極１２０と電極１６０とは外部負荷によって電気的に接続された状態にあり、その結果、電子は電極１２０から前記負荷を通って電極１６０へと通過する。

【００２８】

一部の実施形態において、電子供与体または受容体材料は１種以上のポリマー（例えばホモポリマーまたはコポリマー）を含有することができる。本願で述べるポリマーは、少なくとも２個の同一または異なるモノマー繰り返し単位（例えば少なくとも５個のモノマー繰り返し単位、少なくとも１０個のモノマー繰り返し単位、少なくとも５０個のモノマー繰り返し単位、少なくとも１００個のモノマー繰り返し単位、または少なくとも５００個のモノマー繰り返し単位）を含む。本願で述べるホモポリマーとは、１種類のみのモノマー繰り返し単位を含むポリマーを指す。本願で述べるコポリマーとは、異なる化学構造を有する少なくとも２個のコモノマー繰り返し単位を含むポリマーを指す。前記ポリマーは光起電力活性であり得る。

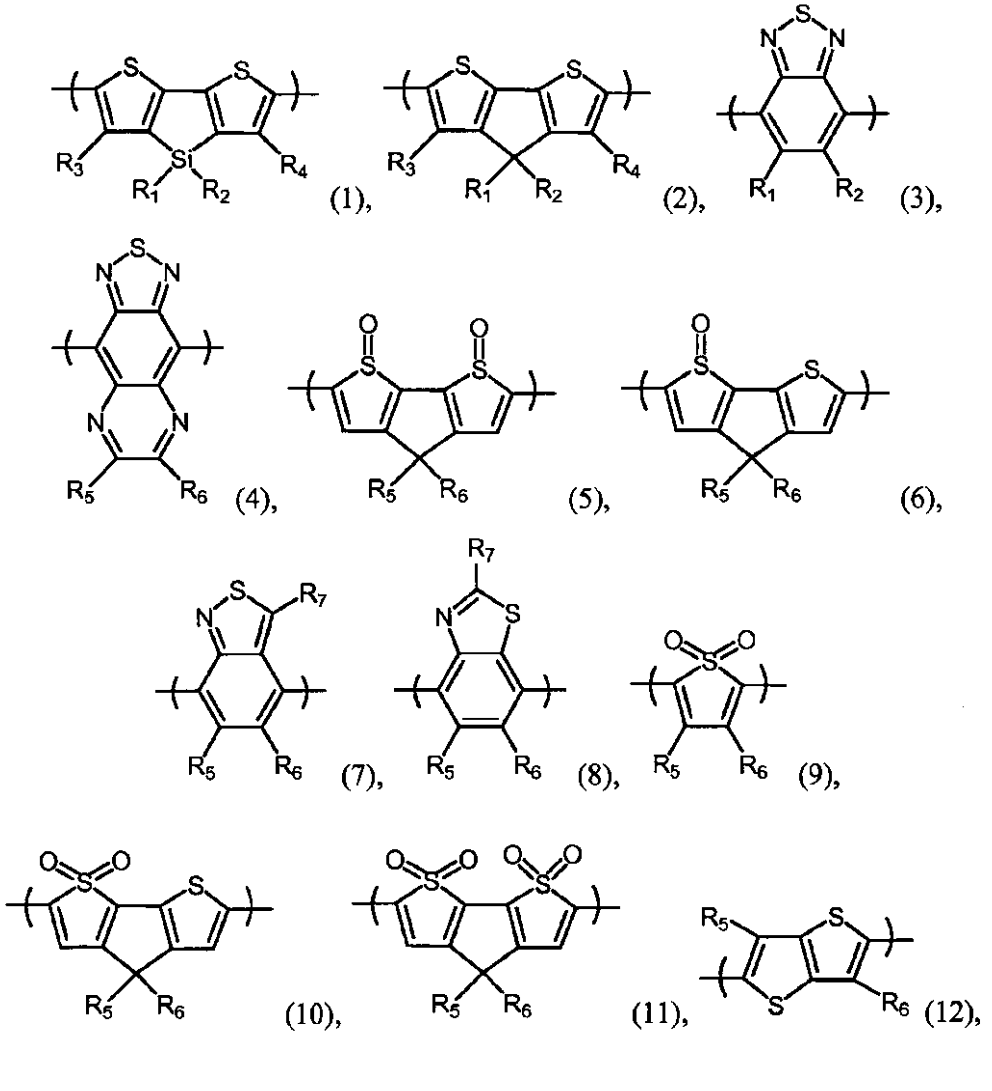
【００２９】

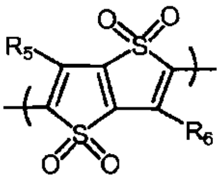
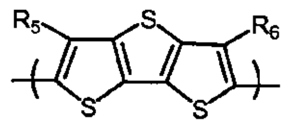
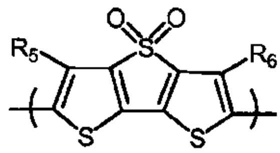
一部の実施形態において、電子供与体または受容体材料は、以下のコモノマー繰り返し単位、すなわち、式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分、式（２）のシクロペンタジチオフェン部分、式（３）のベンゾチアジアゾール部分、式（４）のチアジアゾロキノキサリン部分、式（５）のシクロペンタジチオフェンジオキシド部分、式（６）のシクロペンタジチオフェンモノオキシド部分、式（７）のベンゾイソチアゾール部分、式（８）のベンゾチアゾール部分、式（９）のチオフェンジオキシド部分、式（１０）のシクロペンタジチオフェンジオキシド部分、式（１１）のシクロペンタジチオフェンテトラオキシド部分、式（１２）のチエノチオフェン部分、式（１３）のチエノチオフェンテトラオキシド部分、式（１４）のジチエノチオフェン部分、式（１５）のジチエノチオフェンジオキシド部分、式（１６）のジチエノチオフェンテトラオキシド部分、式（１７）のテトラヒドロイソインドール部分、式（１８）のチエノチオフェンジオキシド部分、式（１９）のジチエノチオフェンジオキシド部分、式（２０）のフルオレン部分、式（２１）のシロール部分、式（２２）のフルオレノン部分、式（２３）のチアゾール部分、式（２４）

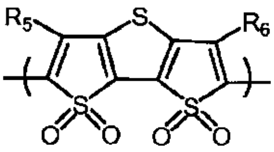
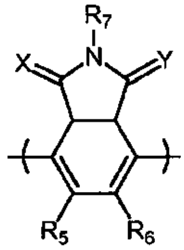
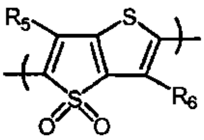
のセレノフェン部分、式（２５）のチアゾロチアゾール(thiazolothiazole)部分、式（２６）のシクロペンタジチアゾール部分、式（２７）のナフトチアジアゾール部分、式（２８）のチエノピラジン(thienopyrazine)部分、式（２９）のオキサゾール部分、式（３０）のイミダゾール部分、式（３１）のピリミジン部分、式（３２）のベンゾオキサゾール部分、式（３３）のベンゾイミダゾール部分または式（３４）のベンゾオキサジアゾール部分のうちの１つ以上を含むことができる。

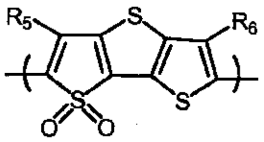
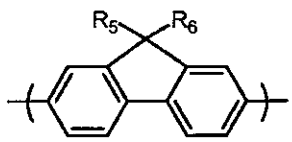
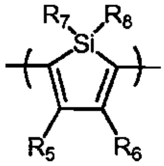
【００３０】

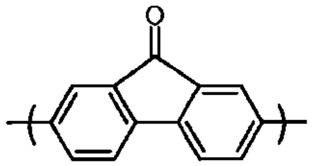
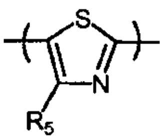
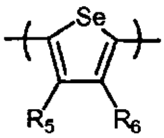
【化５】

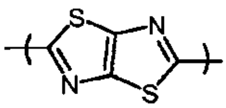
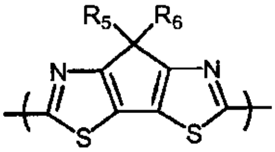
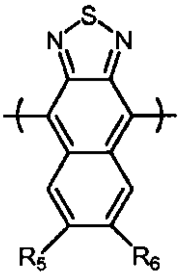


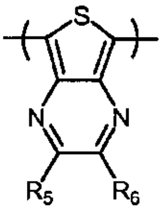
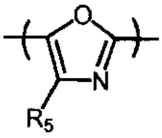
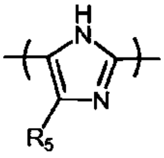
 (13),  (14),  (15),

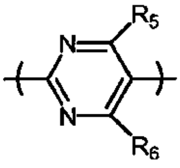
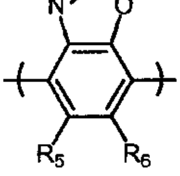
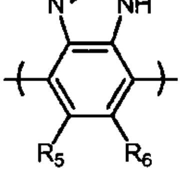
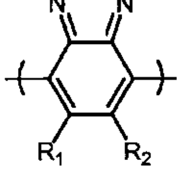
 (16),  (17),  (18),

 (19),  (20),  (21),

 (22),  (23),  (24),

 (25),  (26),  (27),

 (28),  (29),  (30),

 (31),  (32),  (33), or  (34),

上記の式において、ＸおよびＹの各々は独立して、ＣＨ$_2$、ＯまたはＳであり得、Ｒ$_1$、Ｒ$_2$、Ｒ$_3$、Ｒ$_4$、Ｒ$_5$、およびＲ$_6$の各々は独立して、Ｈ、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルコキシ、Ｃ$_3$～Ｃ$_{20}$シクロアルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはＳＯ$_2$Ｒであり得、ここで、Ｒは、Ｈ、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルキル、Ｃ$_1$～Ｃ$_{20}$アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、Ｃ$_3$～Ｃ$_{20}$シクロアルキル、またはＣ$_1$～Ｃ$_{20}$ヘテ

ロシクロアルキルであり、R_7およびR_8の各々は独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルであり得る。

【００３１】

アルキルは飽和していてもよいし、不飽和であってもよく、分岐していてもよいし、または直鎖であってもよい。C_1～C_{20}アルキルは、１～２０個の炭素原子（例えば１個、２個、３個、４個、５個、６個、７個、８個、９個、１０個、１１個、１２個、１３個、１４個、１５個、１６個、１７個、１８個、１９個および２０個の炭素原子）を含有する。アルキル部分の例としては、$-CH_3$、$-CH_2-$、$-CH_2=CH_2-$、$-CH_2-CH=CH_2$、および分岐$-C_3H_7$が挙げられる。アルコキシは、分岐していてもよいし、または直鎖であってもよく、さらに飽和していてもよいし、または不飽和であってもよい。C_1～C_{20}アルコキシは、酸素ラジカルと、１～２０個の炭素原子（例えば１個、２個、３個、４個、５個、６個、７個、８個、９個、１０個、１１個、１２個、１３個、１４個、１５個、１６個、１７個、１８個、１９個および２０個の炭素原子）とを含有する。アルコキシ部分の例としては、$-OCH_3$および$-OCH=CH-CH_3$が挙げられる。シクロアルキルは飽和していてもよいし、あるいは不飽和であってもよい。C_3～C_{20}シクロアルキルは、３～２０個の炭素原子（例えば３個、４個、５個、６個、７個、８個、９個、１０個、１１個、１２個、１３個、１４個、１５個、１６個、１７個、１８個、１９個および２０個の炭素原子）を含有する。シクロアルキル部分の例としてはシクロヘキシルおよびシクロヘキセン－３－イルが挙げられる。ヘテロシクロアルキルもまた飽和していてもよいし、あるいは不飽和であってもよい。C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルは、少なくとも１つの環ヘテロ原子（例えばＯ、ＮおよびＳ）と、１～２０の炭素原子（例えば１個、２個、３個、４個、５個、６個、７個、８個、９個、１０個、１１個、１２個、１３個、１４個、１５個、１６個、１７個、１８個、１９個および２０個の炭素原子）とを含有する。ヘテロシクロアルキル部分の例としては、４－テトラヒドロピラニルおよび４－ピラニルが挙げられる。アリールは１つ以上の芳香環を含有することができる。アリール部分の例としては、フェニル、フェニレン、ナフチル、ナフチレン、ピレニル、アントリルおよびフェナントリルが挙げられる。ヘテロアリールは、１つ以上の芳香環を含有することができ、その芳香環の少なくとも１つは、少なくとも１つの環ヘテロ原子（例えばＯ、ＮおよびＳ）を含有する。ヘテロアリール部分の例としては、フリル、フリレン、フルオレニル、ピロリル、チエニル、オキサゾリル、イミダゾリル、チアゾリル、ピリジル、ピリミジニル、キナゾリニル、キノリル、イソキノリルおよびインドリルが挙げられる。

【００３２】

他に規定がない限り、本願で述べるアルキル、アルコキシ、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、およびヘテロアリールは、置換部分および非置換部分の双方を含む。シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールおよびヘテロアリール上の置換基の例としては、C_1～C_{20}アルキル、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、アリールオキシ、ヘテロアリール、ヘテロアリールオキシ、アミノ、C_1～C_{10}アルキルアミノ、C_1～C_{20}ジアルキルアミノ、アリールアミノ、ジアリールアミノ、ヒドロキシル、ハロゲン、チオ、C_1～C_{10}アルキルチオ、アリールチオ、C_1～C_{10}アルキルスルホニル、アリールスルホニル、シアノ、ニトロ、アシル、アシルオキシ、カルボキシルおよびカルボン酸エステルが挙げられる。アルキル上の置換基の例としては、C_1～C_{20}アルキル以外の上述した置換基のすべてが挙げられる。シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールおよびヘテロアリールはまた縮合基(fused groups)を含む。

【００３３】

一部の実施形態において、電子供与体または受容体材料は、第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含むコポリマーであり得、第１コモノマー繰り返し単位はシラシクロペンタジチオフェン部分を含み、第

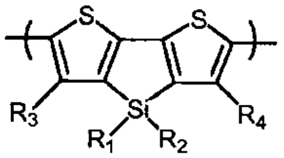
２コモノマー繰り返し単位はシクロペンタジチオフェン部分を含み、第３コモノマー繰り返し単位はベンゾチアジアゾール部分を含む。

【００３４】

一部の実施形態において、第１コモノマー繰り返し単位は、式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分を含む。

【００３５】

【化６】



(1),

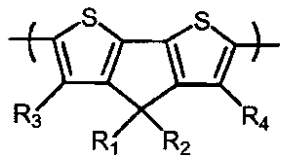
前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり得、ＲはＨ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3〜C_{20}シクロアルキルまたはC_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキルである。特定の実施形態では、R_1およびR_2の各々は独立して、C_1〜C_{20}アルキル（例えば２－エチルヘキシル）である。

【００３６】

一部の実施形態において、第２コモノマー繰り返し単位は、式（２）のシクロペンタジチオフェン部分を含む。

【００３７】

【化７】



(2),

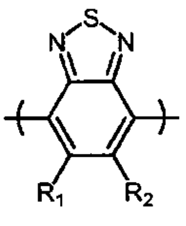
前記式中、R_1、R_2、R_3、およびR_4の各々は、独立して、Ｈ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、C_3〜C_{20}シクロアルキル、C_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり得、ＲはＨ、C_1〜C_{20}アルキル、C_1〜C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3〜C_{20}シクロアルキルまたはC_1〜C_{20}ヘテロシクロアルキルである。特定の実施形態では、R_1およびR_2の各々は独立して、C_1〜C_{20}アルキル（例えば２－エチルヘキシル）である。

【００３８】

一部の実施形態において、第３コモノマー繰り返し単位は、式（３）のベンゾチアジアゾール部分を含む。

【００３９】

【化８】



(3),

前記式中、R_1およびR_2の各々は独立して、Ｈ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、C_3～C_{20}シクロアルキル、C_1～C_{20}ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、ハロ、ＣＮ、ＯＲ、Ｃ（Ｏ）Ｒ、Ｃ（Ｏ）ＯＲ、またはSO_2Rであり得、ＲはＨ、C_1～C_{20}アルキル、C_1～C_{20}アルコキシ、アリール、ヘテロアリール、C_3～C_{20}シクロアルキルまたはC_1～C_{20}ヘテロシクロアルキルである。特定の実施形態において、R_1およびR_2の各々はＨである。

【００４０】

理論によって縛られることを望むものではないが、光活性ポリマーに式（１）のシラシクロペンタジチオフェン部分を組み込むことにより、ポリマーの可溶性および加工性、およびそのようなポリマーから調製された光活性層のモルフォロジーを著しく改善することができ、それにより光起電力セルの効率を増大させると考えられる。さらに、理論によって縛られることを望むものではないが、光活性ポリマーにシラシクロペンタジチオフェン部分を組み込むことにより、ポリマーの吸収波長を、ほとんどの他のポリマーによっては到達することができない電磁スペクトルの赤色および近赤外（ＩＲ）部（例えば６５０～９００ｎｍ）に向かって偏移させることができると考えられる。そのようなコポリマーが光起電力セルに組み込まれると、該電池はスペクトルのこの領域の光を吸収することが可能となり、それにより該電池の電流および効率を増大させる。例えば、式（２）および式（３）のコモノマー繰り返し単位を有する光活性ポリマーを、式（１）、（２）、および（３）のコモノマー繰り返し単位を有する光活性ポリマーと置き換えることにより、ＡＭ１．５の条件下で、光起電力セルの効率を約３％から約５％に増大させることができる。

【００４１】

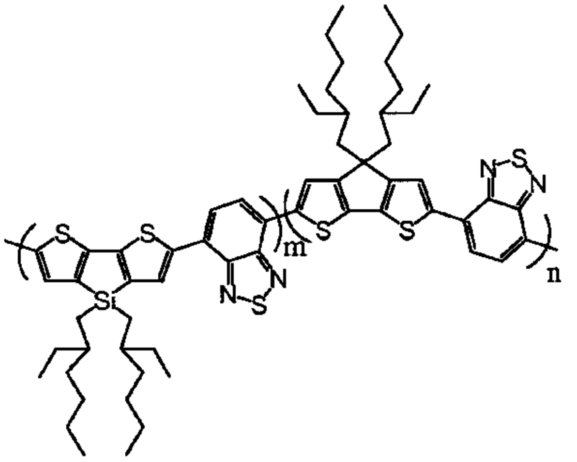
一般に、ポリマー中のコモノマー繰り返し単位の分子比は所望により変えることができる。一部の実施形態において、第１第２コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比は、少なくとも約１：１（例えば、少なくとも約２：１、少なくとも約３：１、または少なくとも４：１）であり、かつ／または多くとも約１０：１（例えば、多くとも約５：１、多くとも約４：１、多くとも約３：１、または多くとも約２：１）である。理論によって縛られることを望むものではないが、第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比が約５：１より高い場合には、結果として生じたポリマーを基材上でコーティングを形成するように加工することが困難である可能性があり、これは光活性ポリマーのモルフォロジーに悪影響を与え、光起電力セルの効率を低下させ得ると考えられる。さらに理論によって縛られることを望むものではないが、第１コモノマー繰り返し単位と第２コモノマー繰り返し単位との分子比が約１：１約未満である場合には、そのようなポリマーを含有する光起電力セルは、稼働の間に十分な効率を有さないことがあると考えられる。

【００４２】

光活性層１４０に用いることができる例示的なポリマーは、

【００４３】

【化９】



である。前記式中、ｍおよびｎの各々は独立して、１を超える整数（例えば２、３、５、１０、２０あるいは１００）である。このポリマーは優れた加工性（例えば溶液コーティング工程において）を有することができ、ＡＭ１．５の条件下で、少なくとも約５％の効率を有する光起電力セルを調製するために用いることができる。前記ポリマーは以下の実施例１～実施例３に記載する方法によって調製することができる。

【００４４】

理論によって縛られることを望むものではないが、上述した第１コモノマー繰り返し単位、第２コモノマー繰り返し単位、および第３コモノマー繰り返し単位を含有する光活性ポリマーを有する光起電力セルは、高い効率を有し得ると考えられる。一部の実施形態において、そのような光起電力セルは、ＡＭ１．５の条件下で、少なくとも約４％（例えば少なくとも約５％、または少なくとも６％）の効率を有することができる。さらに理論によって縛られることを望むものではないが、上述したポリマーのその他の効果としては、光電流およびセル電圧を改善することができる適当なバンドギャップ（例えば１．４－１．６ｅＶ）、光活性層１４０における電荷分離を促進することができる高い正電荷移動性（例えば$１０^{－４}$～$１０^{－１}$　$ｃｍ^{２}$／Ｖｓ）、および皮膜形成能および加工性を改善することができる有機溶媒中における高い可溶性が挙げられるものと考えられる。一部の実施形態において、ポリマーは光学的に非散乱性であり得る。

【００４５】

上述したポリマーは当業において既知の方法によって調製することができる。例えば、コポリマーは、遷移金属触媒の存在下における、２つの有機金属基（例えばアルキルスタンニル基、グリニャール基またはアルキル亜鉛基）を含有する１つ以上のコモノマーと、２つのハロ基（例えばＣｌ、ＢｒまたはＩ）を含有する１つ以上のコモノマーとの間のクロスカップリング反応によって調製することができる。別の実施例として、コポリマーは、遷移金属触媒の存在下における、２つのホウ酸基(borate groups)を含有する１つ以上のコモノマーと、２つのハロ基（例えばＣｌ、ＢｒまたはＩ）を含有する１つ以上のコモノマーとの間のクロスカップリング反応によって調製することができる。上述したコポリマーを調製するために用いることができる他の方法としては、鈴木カップリング反応、根岸カップリング反応、熊田カップリング反応およびシュティレ(Stille)カップリング反応が挙げられ、それらのすべては当業においてよく知られている。

【００４６】

前記コモノマーは、本願に記載する方法、または米国特許出願第１１／４８６，５３６号、コッポ(Coppo)ら、Macromolecules　２００３年、第３６巻、第２７０５～２７１１頁、およびカート(Kurt)ら、J. Heterocycl. Chem.、１９７０年、第６巻、第６２９頁に記載されているもののような当業において知られている方法によって調製することができる。前記文献の全容は、参照により、本願に援用される。前記コモノマーは、非芳香族性二

重結合および１つ以上の不斉中心を含有することができる。したがって、それらは、ラセミ化合物およびラセミ混合物、単一エナンチオマー、個々のジアステレオマー、ジアステレオマー混合物、およびシス－またはトランス－異性体として生じ得る。全てのそのような異性体が企図される。

【００４７】

一部の実施形態において、光活性層１４０の電子受容体材料はフラーレンを含有し得る。一部の実施形態において、光活性層１４０は１つ以上の非置換フラーレンおよび／または１つ以上の置換フラーレンを含有し得る。非置換フラーレンの例としては、C_{60}、C_{70}、C_{76}、C_{78}、C_{82}、C_{84}およびC_{92}が挙げられる。置換フラーレンの例としては、ＰＣＢＭ、または、任意でC_1～C_{20}アルコキシおよび／またはハロによってさらに置換されたC_1～C_{20}アルコキシ（例えば（OCH_2CH_2）$_2OCH_3$または$OCH_2CF_2OCF_2CF_2OCF_3$）で置換されたフラーレンが挙げられる。理論によって縛られることを望むものではないが、長鎖アルコキシ基（例えばエチレンオキシドオリゴマー(oligomeric ethylene oxide）またはフッ素化アルコキシ基で置換されたフラーレンは、有機溶媒中における改善された可溶性を有し、改善されたモルフォロジーを備えた光活性層を形成することができると考えられる。一部の実施形態において、電子受容体材料は、上述したポリマーの１つ以上を含有し得る。特定の実施形態では、電子受容体材料の組み合わせを光活性層１４０に用いることができる。

【００４８】

光起電力セル１００の他の構成要素に移ると、基材１１０は、一般に透明材料から形成されている。本願で述べる場合、透明材料とは、光起電力セル１００に使用される厚さにおいて、光起電力セルの稼働の間に用いられる一定の波長または一定範囲の波長の入射光の少なくとも約６０％（例えば、少なくとも約７０％、少なくとも約７５％、少なくとも約８０％、少なくとも約８５％）を透過する材料である。基材１１０を形成することができる例示的な材料としては、ポリエチレンテレフタレート、ポリイミド、ポリエチレンナフタレート、高分子炭化水素、セルロースポリマー、ポリカーボネート、ポリアミド、ポリエーテルおよびポリエーテルケトンが挙げられる。特定の実施形態において、ポリマーはフッ素化ポリマーであり得る。一部の実施形態において、ポリマー材料の組み合わせが用いられる。特定の実施形態において、基材１１０の異なる領域は、異なる材料から形成され得る。

【００４９】

一般に、基材１１０は可撓性であってもよいし、半硬質(semi-rigid)であってもよいし、または硬質(rigid)（例えばガラス）であってもよい。一部の実施形態において、基材１１０は、約５，０００メガパスカル未満（例えば約１，０００メガパスカル未満、約５００メガパスカル未満）の曲弾性率を有する。特定の実施形態において、基材１１０の異なる領域が、可撓性、半硬質、または不撓性であり得る（例えば、１つ以上の可撓性の領域および１つ以上の半硬質の異なる領域、１つ以上の可撓性の領域および１つ以上の不撓性の異なる領域）。

【００５０】

典型的には、基材１１０は、少なくとも約１ミクロン（例えば少なくとも約５ミクロン、少なくとも約１０ミクロン）の厚さであり、かつ／または、多くとも約１，０００ミクロン（例えば、多くとも約５００ミクロン厚、多くとも約３００ミクロン厚、多くとも約２００ミクロン厚、多くとも約１００ミクロン、多くとも約５０ミクロン）の厚さである。

【００５１】

一般に、基材１１０は着色されていてもよいし、無着色であってもよい。一部の実施形態において、基材１１０の１つ以上の部分は着色されており、基材１１０の１つ以上の異なる部分は無着色である。

【００５２】

基材１１０は、１つの平面（例えば、光が衝突する表面）、または２つの平面（例えば

、光が衝突する表面および対向面）を有してもよいし、あるいは平面を有さなくてもよい。基材１１０の非平面は、例えば湾曲しているか、または段を有し得る。一部の実施形態において、基材１１０の非平面はパターン形成されている（例えば、フレネルレンズ、レンチキュラーレンズまたはレンズ状プリズムを形成するパターン形成された段を有する）。

【００５３】

電極１２０は、一般に導電性材料から形成されている。例示的な導電性材料としては、導電性金属、導電性合金、導電性ポリマーおよび導電性金属酸化物が挙げられる。例示的な導電性金属としては、金、銀、銅、アルミニウム、ニッケル、パラジウム、白金およびチタンが挙げられる。例示的な導電性合金としては、ステンレス鋼（例えば３３２ステンレス鋼、３１６ステンレス鋼）、金の合金、銀の合金、銅の合金、アルミニウムの合金、ニッケルの合金、パラジウムの合金、白金の合金、およびチタンの合金が挙げられる。例示的な導電性ポリマーとしては、ポリチオフェン（例えばドープしたポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）（ドープしたＰＥＤＯＴ）、ポリアニリン（例えばドープしたポリアニリン）、ポリピロール（例えばドープしたポリピロール）が挙げられる。例示的な導電性金属酸化物としては、インジウムスズ酸化物、フッ素添加酸化スズ(fluorinated tin oxide)、酸化スズおよび酸化亜鉛が挙げられる。一部の実施形態において、導電性材料の組み合わせが用いられる。

【００５４】

一部の実施形態において、電極１２０はメッシュ電極を備えることができる。メッシュ電極の例は、同時係属中の米国特許出願公開公報第２００４０１８７９１１号および同第２００６００９０７９１号に記載されている。前記特許文献の全容は、参照により本願に援用される。

【００５５】

一部の実施形態において、上述した材料の組み合わせを電極１２０に使用することができる。

任意で、光起電力セル１００は正孔ブロッキング層１３０を備えることができる。正孔ブロッキング層は、一般に、光起電力セル１００に使用される厚さにおいて、電極１２０に電子を輸送し、かつ電極１２０への正孔の輸送を実質的に妨げる材料から形成されている。正孔ブロッキング層を形成することができる材料の例としては、ＬｉＦ、金属酸化物（例えば、酸化亜鉛、酸化チタン）およびアミン（例えば、第一アミン、第二アミン、または第三アミン）が挙げられ得る。正孔ブロッキング層に使用するのに適したアミンの例は、例えば、同時係属中の米国特許仮出願第６０／９２６，４５９号に記載されている。前記特許文献の全容は、参照により、本願に援用される。

【００５６】

理論によって縛られることを望むものではないが、光起電力セル１００がアミンから形成された正孔ブロッキング層を備えている場合、その正孔ブロッキング層は、ＵＶ光に曝露されなくても、光活性層１４０と電極１２０との間のオーム接触の形成を容易にすることができ、それにより紫外線曝露から生じる光起電力セル１００への損傷を低減することができる。

【００５７】

典型的には、正孔ブロッキング層１３０は、少なくとも０．０２ミクロン（例えば、少なくとも約０．０３ミクロン、少なくとも約０．０４ミクロン、少なくとも約０．０５ミクロン）の厚さであり、かつ／または多くとも約０．５ミクロン（例えば、多くとも約０．４ミクロン、多くとも約０．３ミクロン、多くとも約０．２ミクロン、多くとも約０．１ミクロン）の厚さである。

【００５８】

正孔キャリア層１５０は、一般に、光起電力セル１００に使用される厚さにおいて、電極１６０に正孔を輸送し、かつ電極１６０への電子の輸送を実質的に妨げる材料から形成されている。層１３０を形成することができる材料の例としては、ポリチオフェン（例え

ばＰＥＤＯＴ）、ポリアニリン、ポリカルバゾール、ポリビニルカルバゾール、ポリフェニレン、ポリフェニルビニレン、ポリシラン、ポリチエニレンビニレン、ポリイソチアナフタネン(polyisothianaphthanenes)およびそれらのコポリマーが挙げられる。一部の実施形態において、正孔キャリア層１５０は、半導体高分子と組み合わせて用いられるドーパントを含み得る。ドーパントの例としては、ポリ（スチレンスルホネート）、高分子スルホン酸(polymeric sulfonic acids)またはフッ素化ポリマー（例えばフッ素化イオン交換ポリマー）が挙げられる。

【００５９】

一部の実施形態において、正孔キャリア層１５０を形成するために用いることができる材料としては、酸化チタン、酸化亜鉛、酸化タングステン、酸化モリブデン、酸化銅、ストロンチウム銅酸化物またはストロンチウムチタン酸化物のような金属酸化物が挙げられる。金属酸化物は、未ドープであってもよいし、またはドーパントでドープされていてもよい。金属酸化物用ドーパントの例としては、フッ化物、塩化物、臭化物およびヨウ化物の塩または酸が挙げられる。

【００６０】

一部の実施形態において、正孔キャリア層１５０を形成するために用いることができる材料として、炭素同素体（例えばカーボンナノチューブ）が挙げられる。炭素同素体はポリマーバインダーに埋め込むことができる。

【００６１】

一部の実施形態において、正孔キャリア材料は、ナノ粒子の形態にあり得る。ナノ粒子は、球形、円柱状、または棒状の形状のような任意の適当な形状を有し得る。

一部の実施形態において、正孔キャリア層１５０は、上述した正孔キャリア材料の組み合わせを含有し得る。

【００６２】

一般に、正孔キャリア層１５０の厚さ（すなわち光活性層１４０に接触する正孔キャリア層１５０の表面と、正孔キャリア層１５０に接触する電極１６０の表面との間の距離）は所望のように変更することができる。典型的には、正孔キャリア層１５０の厚さは、少なくとも０．０１ミクロン（例えば、少なくとも約０．０５ミクロン、少なくとも約０．１ミクロン、少なくとも約０．２ミクロン、少なくとも約０．３ミクロン、または少なくとも約０．５ミクロン）であり、かつ／または多くとも約５ミクロン（例えば、多くとも約３ミクロン、多くとも約２ミクロンまたは多くとも約１ミクロン）である。一部の実施形態において、正孔キャリア層１５０の厚さは約０．０１ミクロン～約０．５ミクロンである。

【００６３】

電極１６０は、一般に、上述した導電性材料のうちの１つ以上のような導電性材料から形成されている。一部の実施形態において、電極１６０は導電性材料の組み合わせから形成されている。特定の実施形態において、電極１６０はメッシュ電極から形成され得る。

【００６４】

基材１７０は、基材１１０と同一であってもよいし、または基材１１０とは異なっていてもよい。一部の実施形態において、基材１７０は、上記に記載された基材１１０に用いられるポリマーのような１つ以上の適当なポリマーから形成され得る。

【００６５】

一部の実施形態において、上述したポリマーは、２つの光起電力セルがコモン電極を共有する系において、電子供与体材料または電気受容体材料として用いることができる。そのような系はまたタンデム型光起電力セルとしても知られている。図２は、２つのセミセル(semi-cells)２０２，２０４を有するタンデム型光起電力セル２００を示している。セミセル２０２は、電極２２０、任意の正孔ブロッキング層２３０、第１光活性層２４０、および再結合層２４２を備える。セミセル２０４は、再結合層２４２、第２光活性層２４４、正孔キャリア層２５０および電極２６０を備える。光起電力セル２００には、電極２２０，２６０を介して、外部負荷が接続されている。

【００６６】
生産工程および所望の装置構造によって、セミセルにおける電流フローは、特定の層の電子／正孔伝導性を変更する（例えば正孔ブロッキング層２３０を正孔キャリア層に変える）ことによって逆転させせることができる。そうすることによって、タンデムセルは、タンデムセル内のセミセルが電気的に直列または並列のいずれかに相互接続することができるように設計され得る。

【００６７】
再結合層とは、第１セミセルから発生した電子が第２セミセルから生成された正孔と再結合する、タンデムセル内の層を指す。再結合層２４２は典型的にはｐ型半導体材料およびｎ型半導体材料を含む。一般に、ｎ型半導体材料は電子を選択的に輸送し、ｐ型半導体材料は正孔を選択的に輸送する。結果として、第１セミセルから生成された電子はｎ型半導体材料とｐ型半導体材料との界面において第２セミセルから生成された正孔と再結合する。

【００６８】
一部の実施形態において、ｐ型半導体材料はポリマーおよび／または金属酸化物を含む。ｐ型半導体ポリマーの例としては、ポリチオフェン（例えば、ポリ（３，４－エチレンジオキシチオフェン）（ＰＥＤＯＴ））、ポリアニリン、ポリビニルカルバゾール、ポリフェニレン、ポリフェニルビニレン、ポリシラン、ポリチエニレンビニレン、ポリイソチアナフタネン(polyisothianaphthanenes)、ポリシクロペンタジチオフェン、ポリシラシクロペンタジチオフェン、ポリシクロペンタジチアゾール(polycyclopentadithiazoles)、ポリチアゾロチアゾール、ポリチアゾール、ポリベンゾチアジアゾール、ポリ（チオフェンオキシド）、ポリ（シクロペンタジチオフェンオキシド）、ポリチアジアゾロキノキサリン、ポリベンゾイソチアゾール、ポリベンゾチアゾール、ポリチエノチオフェン、ポリ（チエノチオフェンオキシド）、ポリジチエノチオフェン、ポリ（ジチエノチオフェンオキシド）、ポリテトラヒドロイソインドール（polytetrahydroisoindoles）、およびそれらのコポリマーが挙げられる。金属酸化物は、真性ｐ型半導体（例えば、酸化銅、ストロンチウム銅酸化物またはストロンチウムチタン酸化物）、またはドーパントでドープした後にｐ型半導体を形成する金属酸化物（例えば、ｐ－ドープした酸化亜鉛またはｐ－ドープした酸化チタン）であり得る。ドーパントの例としては、フッ化物、塩化物、臭化物およびヨウ化物の塩または酸が挙げられる。一部の実施形態において、金属酸化物は、ナノ粒子の形で用いることができる。

【００６９】
一部の実施形態において、ｎ型半導体材料（真性導体材料またはドープしたｎ型半導体材料のいずれか）は、酸化チタン、酸化亜鉛、酸化タングステン、酸化モリブデンおよびそれらの組み合わせのような金属酸化物を含む。金属酸化物は、ナノ粒子の形で用いることができる。他の実施形態では、ｎ型半導体材料としては、フラーレン、無機ナノ粒子、オキサジアゾール、ディスコティック液晶、炭素ナノロッド、無機ナノロッド、ＣＮ基を含有するポリマー、CF_3基を含有するポリマーおよびそれらの組み合わせのうちから選択される材料が挙げられる。

【００７０】
一部の実施形態では、ｐ型半導体材料とｎ型半導体材料とが１つの層内に混合されている。特定の実施形態では、再結合層２４２は２つの層を備え、一方の層はｐ型半導体材料を含有し、他方の層はｎ型半導体材料を含有する。そのような実施形態では、再結合層２４２は、２つの層の界面においてｎ型半導体材料とｐ型半導体材料とが混合した層を含むことができる。

【００７１】
一部の実施形態において、再結合層２４２は、少なくとも約３０重量％（例えば少なくとも約４０重量％、または少なくとも約５０重量％）、かつ／または多くとも約７０重量％（例えば多くとも約６０重量％、または多くとも約５０重量％）のｐ型半導体材料を含有する。一部の実施形態において、再結合層２４２は、少なくとも約３０重量％（例えば

少なくとも約４０重量％、または少なくとも約５０重量％）、かつ／または多くとも約７０重量％（例えば多くとも約６０重量％、または多くとも約５０重量％）のｎ型半導体材料を含有する。

【００７２】

再結合層２４２は一般に、下の位置する層が再結合層２４２上に施される任意の溶媒から保護されるように、十分な厚さを有する。一部の実施形態において、再結合層２４２は、少なくとも約１０ｎｍ（例えば少なくとも約２０ｎｍ、少なくとも約５０ｎｍ、または少なくとも約１００ｎｍ）の厚さを有し、かつ／または、多くとも約５００ｎｍ（例えば、多くとも約２００ｎｍ、多くとも約１５０ｎｍ、または多くとも約１００ｎｍ）の厚さを有することができる。

【００７３】

一般に、再結合層２４２は実質的に透明である。例えば、タンデム型光起電力セル２００に用いられる厚さにおいて、再結合層２４２は、光起電力セルの稼働の間に用いられる一定波長または一定範囲の波長（例えば約３５０ｎｍ～約１，０００ｎｍまで）の入射光の少なくとも約７０％（例えば少なくとも約７５％、少なくとも約８０％、少なくとも約８５％、または少なくとも約９０％）を透過させることができる。

【００７４】

再結合層２４２は一般に十分に低い表面抵抗を有する。一部の実施形態において、再結合層２４２は、多くとも約１×１０^{6}オーム／スクエア（例えば多くとも約５×１０^{5}オーム／スクエア、多くとも約２×１０^{5}オーム／スクエアまたは多くとも約１×１０^{5}オーム／スクエア）の表面抵抗を有する。

【００７５】

理論によって縛られることを望むものではないが、再結合層２４２は、光起電力セル２００において、２つのセミセル（例えば一方は電極２２０、正孔ブロッキング層２３０、光活性層２４０および再結合層２４２を備え、他方は、再結合層２４２、光活性層２４４、正孔キャリア層２５０および電極２６０を備える）の間のコモン電極と見なすことができると考えられる。一部の実施形態において、再結合層２４２は、上述したもののような導電性格子（例えばメッシュ）材料を含むことができる。導電性格子材料は、セミセルに同一の極性（ｐ型またはｎ型のいずれか）の選択的な接触を提供し、負荷に電子を輸送する高度に伝導性だが透明な層を提供することができる。

【００７６】

一部の実施形態において、再結合層２４２は、光活性層上にｎ型半導体材料とｐ型半導体材料との混和物を塗布することにより調製され得る。例えば、ｎ型半導体およびｐ型半導体は、まず、共に溶媒中に分散および／または溶解されて分散液または溶液を形成し、次にその分散液または溶液を光活性層上にコーティングして再結合層を形成する。

【００７７】

一部の実施形態において、二層再結合層はｎ型半導体材料の層と、ｐ型半導体材料の層とを別々に塗布することにより調製することができる。例えば、酸化チタンナノ粒子がｎ型半導体材料として用いられる場合、酸化チタンナノ粒子の層は、（１）前駆体（例えばチタン塩）を溶媒（例えば無水アルコール）中に分散させることにより分散液を形成し、（２）その分散液を光活性層上にコーティングし、（３）前記分散液を加水分解して酸化チタン層を形成し、（４）その酸化チタン層を乾燥させることによって形成することができる。別の例として、ポリマー（例えばＰＥＤＯＴ）がｐ型半導体として用いられる場合には、ポリマー層は、まずポリマーを溶媒（例えば無水アルコール）中に溶解させて溶液を形成し、次にその溶液を光活性層上にコーティングすることによって形成することができる。

【００７８】

タンデムセル２００の他の構成要素は、上述した光起電力セル１００におけるものと同一の材料から形成されているか、または同一の特性を有し得る。タンデム型光起電力セルの他の例は、例えば、同一所有者の同時係属中の米国特許出願公開公報第２００７－０１

８１１７９号および同第２００７－０２４６０９４号に記載されている。前記特許文献の全容は、参照により、本願に援用される。

【００７９】

一部の実施形態において、タンデムセルのセミセルは、電気的に直列に相互接続される。直列に接続される場合、一般に、層は図２に示す順序になり得る。特定の実施形態において、タンデムセルのセミセルは、電気的に並列に相互接続される。並列に相互接続される場合、２つのセミセルを有するタンデムセルは以下の層、すなわち、第１電極、第１正孔ブロッキング層、第１光活性層、第１正孔キャリア層（電極として作用し得る）、第２正孔キャリア層（電極として作用し得る）、第２光活性層、第２正孔ブロッキング層および第２電極を備えることができる。そのような実施形態において、第１正孔キャリア層および第２正孔キャリア層は、２つの独立した層または１つの単層のいずれであってもよい。第１正孔キャリア層および第２正孔キャリア層の伝導性が十分でない場合には、必要な伝導性を提供する付加的な層（例えば導電性メッシュ層）が挿入されてもよい。

【００８０】

一部の実施形態において、タンデムセルは、２個を超えるセミセル（例えば３個、４個、５個、６個、７個、８個、９個、１０個またはより多くのセミセル）を備え得る。特定の実施形態において、いくつかのセミセルは電気的に直列に相互接続され、かつ、いくつかのセミセルは電気的に並列に相互に接続され得る。

【００８１】

一般に、図１および図２に記載された光起電力セルの各層を調製する方法は所望により変更することができる。一部の実施形態では、液体に基づいたコーティング工程によって層を調製することができる。特定の実施形態では、化学気相蒸着法または物理気相蒸着法のような気相に基づいたコーティング工程によって層を調製することができる。

【００８２】

本願に述べる「液体に基づいたコーティング工程」という用語は、液体に基づいたコーティング組成物を用いた工程を指す。液体に基づいたコーティング組成物の例としては、溶液、分散液、または懸濁液が挙げられる。液体に基づいたコーティング工程は、下記の工程、すなわち、溶液コーティング、インクジェット印刷、スピンコーティング、浸漬被覆、ナイフコーティング、バーコーティング、スプレーコーティング、ローラーコーティング、スロットコーティング、グラビアコーティング、フレキソ印刷またはスクリーン印刷のうちの少なくとも１つを用いることにより行なうことができる。液体に基づいたコーティング工程の例は、例えば同一人所有である(commonly-owned)同時係属中の米国特許出願公開公報第２００８－０００６３２４号に記載されている。前記特許文献の全容は、参照により、本願に援用される。

【００８３】

一部の実施形態において、層が無機半導体ナノ粒子を含有する場合、液体に基づいたコーティング工程は、（１）ナノ粒子を溶媒（例えば水性溶媒または無水アルコール）と混合して分散液を形成し、（２）その分散液を基材上にコーティングし、（３）コーティングした分散液を乾燥させることによって実施することができる。特定の実施形態において、無機金属酸化物ナノ粒子を含有する層を調製するための液体に基づいたコーティング工程は、（１）前駆体（例えばチタン塩）を適当な溶媒（例えば無水アルコール）中に分散させて分散液を形成し、（２）その分散液を基材上にコーティングし、（３）前記分散液を加水分解して、無機半導体ナノ粒子層（例えば酸化チタンナノ粒子層）を形成し、（４）無機半導体材料層を乾燥させることによって実施することができる。特定の実施形態において、液体に基づいたコーティング工程は、ゾルゲル法によって（例えば、金属酸化物ナノ粒子を分散液中でゾルーゲルとして形成した後に、その分散液を基材上にコーティングすることにより）実施することができる

一般に、有機半導体材料を含有する層を調製するために用いられる液体に基づいたコーティング工程は、無機半導体材料を含有する層を調製するために用いられる方法と同一であってもよいし、異なっていてもよい。一部の実施形態において、層が有機半導体材料を

含有する場合、液体に基づいたコーティング工程は、有機半導体材料を溶媒（例えば有機溶媒）と混合して溶液または分散液を形成し、前記溶液または分散液を基材上にコーティングし、コーティングした溶液または分散液を乾燥させることによって、実施することができる。

【００８４】

一部の実施形態において、図１および図２に記載された光起電力セルは、ロールツーロール法のような連続製造プロセスで調製することができ、それにより製造原価を著しく低減する。ロールツーロール法の例は、例えば同一人所有である同時係属中の米国特許出願公開公報第２００５－０２６３１７９号に記載されている。前記特許文献の全容は、参照により、本願に援用される。

【００８５】

特定の実施形態について開示してきたが、他の実施形態も可能である。一部の実施形態において、光起電力セル１００は、底部電極としてアノードを備え、上部電極としてカソードを備える。一部の実施形態において、光起電力セル１００はまた、底部電極としてカソードを備え、上部電極としてアノードを備えることができる。

【００８６】

一部の実施形態において、光起電力セル１００は、図１に示す層を逆の順序で備えることができる。換言すると、光起電力セル１００はこれらの層を底部から上部に以下の順番で、すなわち、基材１７０、電極１６０、正孔キャリア層１５０、光活性層１４０、任意の正孔ブロッキング層１３０、電極１２０および基材１１０の順番で備えることができる。

【００８７】

一部の実施形態において、多数の光起電力セルが電気的に接続されて、光起電力システムを形成することができる。例として、図３は、光起電力セル３２０を収容するモジュール３１０を有する光起電力システム３００の概略図である。電池３２０は電気的に直列に接続されており、システム３００は負荷３３０に電気的に接続されている。別の実施例として、図４は、光起電力セル４２０を収容したモジュール４１０を有する光起電力システム４００の概略図である。電池４２０は、電気的に並列に接続されており、システム４００は負荷４３０に電気的に接続されている。一部の実施形態において、光起電力システム内の光起電力セルのうちのいくつか（例えばすべて）は１つ以上の共通基材を有し得る。特定の実施形態では、光起電力システム内の一部の光起電力セルは電気的に直列に接続され、光起電力システム内の光起電力セルのうちのいくつかは電気的に並列に接続される。

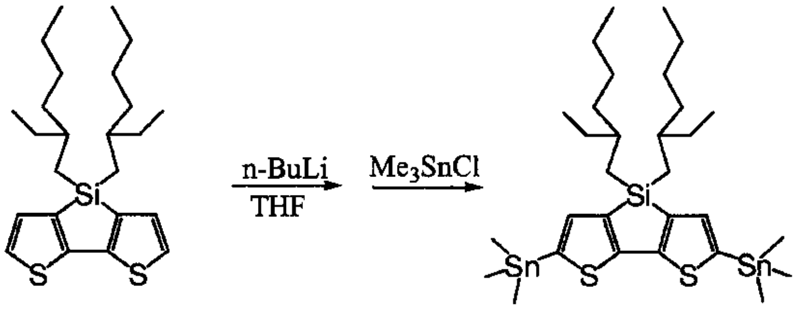
【００８８】

有機光起電力セルについて説明してきたが、他の光起電力セルもまた、本願に記載される新規なポリマーのうちの１つを組み込むことができる。そのような光起電力セルの例としては、色素増感光起電力セルおよびアモルファスシリコン、セレン化カドミウム、テルル化カドミウム、セレン化銅インジウムおよび銅インジウムガリウムセレン化物から形成された光活性材料を有する無機光活性電池が挙げられる。一部の実施形態において、ハイブリッド光起電力セルは、本願に記載されたポリマーのうちの１つを組み込むことができる。

【００８９】

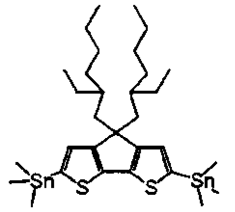
光起電力セルが上述されているが、一部の実施形態では、本願に記載されるポリマーは、他の装置およびシステムにおいて用いることができる。例えば、前記ポリマーは、電界効果トランジスターのような適当な有機半導体の装置、光検出器（例えばＩＲ検出器）、光起電力型検出器、画像化装置（例えばカメラまたは画像診断システム用のＲＧＢ画像化装置）、発光ダイオード（ＬＥＤ）（例えば有機ＬＥＤ（ＯＬＥＤ）またはＩＲまたは近ＩＲ　ＬＥＤ）、レーザー発振装置(lasing devices)、変換層（例えば可視発光をＩＲ発光に変換する層）、電気通信用の増幅器およびエミッター（例えばファイバー用ドーパント）、記憶素子（例えばホログラフィー記憶素子）、およびエレクトロクロミックデバイス（例えばエレクトロクロミック表示装置）に用いられ得る。

【００９０】
以下の実施例は例証であり、限定するようには意図されない。
【実施例１】
【００９１】
２，６－ビス（トリメチルスタンニル）－４，４－ビス（２－エチルヘキシル）－４Ｈ－シロロ［３，２－ｂ：４，５－ｂ’］ジチオフェン(2,6-bis(trimethylstannyl)-4,4-bis(2-ethylhexyl)-4H-silolo[3,2-b:4,5-b']dithiophene)の合成
【００９２】
【化１０】



０．７３７ｇ（約１．７６ｍｍｏｌ）の３，３’－（２－エチルヘキシル）シリレン－２，２’－ジチオフェンを２０ｍＬの新たに蒸留した乾燥ＴＨＦ中に溶解させた。その溶液を１５分間にわたって窒素でパージし、－７８℃に冷却した。ヘキサン（１０ｍｍｏｌ）中４．００ｍＬのｎ－ブチルリチウムを上記のものに滴下して加えた。前記試剤をこの温度で２時間にわたって反応させた。次に、その溶液を室温に暖めた。反応をさらに２．５時間にわたって継続させた後、溶液を再び－７８℃に冷却し、ヘキサン中１２．００ｍＬ（１２．００ｍｍｏｌ）のトリメチルすずクロリドを反応溶液中に滴下して加えた。溶液を－７８℃でさらに２時間にわたって撹拌した後、その溶液を室温に暖めた。反応をさらに１６時間にわたって継続した。反応完了後、１００ｍＬの蒸留水を加え、反応生成物をトルエン（３×６０ｍＬ）で抽出した。合わせた有機相を、蒸留水（３×１５０ｍＬ）で洗浄し、硫酸ナトリウム上にて乾燥させた。次に、有機溶媒を真空下でロータリーエバポレーションによって除去した。残留物をトルエン中に溶解させ、トリエチルアミンで前処理したシリカゲルパッドを介して迅速に通過させた。有機溶媒を真空下で除去して、１．０４８ｇの目標化合物を得た。反応収率は約８６．５０％であった。
【００９３】
$CDCl_3$中の^1H ＮＭＲ：７．００（ｍ，２Ｈ）、１．２５－１．４２（ｍ，１６Ｈ）、０．８６－０．９４（ｍ，１０Ｈ）および０．３８（ｍ，１８Ｈ）。
【実施例２】
【００９４】
４，４－ビス－（２－エチルヘキシル）－２，６－ビス－トリメチルスタンナニル－４Ｈ－シクロペンタ［２，１－ｂ；３，４－ｂ’］ジチオフェン4,4-bis-(2-ethylhexyl)-2,6-bis-trimethylstannanyl-4H-cyclopenta[2,1-b;3,4-b']dithiopheneの合成
【００９５】

【化１１】



出発物質４，４－ビス－（２－エチルヘキシル）－４Ｈ－シクロペンタ［２，１－ｂ；３，４－ｂ’］ジチオフェン（１．５ｇ、０．００３７２ｍｏｌ）を乾燥ＴＨＦ（２０ｍＬ）中に溶解させた。溶液を－７８°Ｃに冷却した後、ブチルリチウム（５．２１ｍＬ、０．０１３０ｍｏｌ）を滴下して加えた。反応混合物をこの温度で１時間にわたって撹拌した。次いで、前記反応混合物を室温に暖め、さらに3時間にわたって撹拌した。その混合物を、－７８°Ｃに再度冷却し、トリメチルすずクロリド（１Ｍのヘキサン中、１５．６ｍＬ、１５．６ｍｍｏｌ）を滴下して加えた。反応混合物を室温に暖め、一晩（約１６時間）撹拌した。

【００９６】

水を加えて、反応物をトルエンで抽出した。有機層を水で洗浄し、硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濃縮した。残留物をトルエン中に溶解させ、トリエチルアミンで前処理したシリカゲルの小さなプラグを介して迅速に通過させた。溶媒を除去し、残留物を真空下で乾燥させた。１．２５ｇの生成物を得た。^{1}Ｈ　ＮＭＲ（ＣＤＣｌ$_3$、２５０ＭＨｚ）：６．９６（ｍ，２Ｈ）、１．８５（ｍ，４Ｈ）、１．２９（ｍ，２Ｈ）、０．９２（ｍ，１６Ｈ）、０．７８（ｔ，６．８Ｈｚ，６Ｈ）、０．６１（ｔ，７．３Ｈｚ，６Ｈ）、０．３８（ｍ，１８Ｈ）。

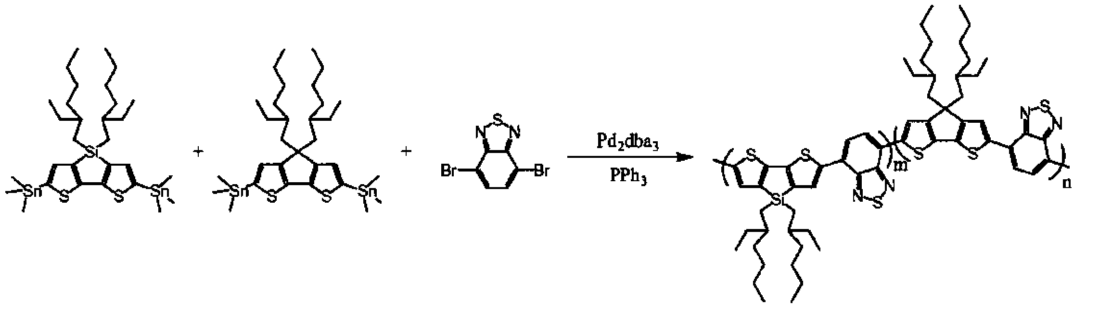
【実施例３】

【００９７】

２，６－ビス（トリメチルスタンニル）－４，４－ビス（２－エチルヘキシル）－４Ｈ－シロロ［３，２－ｂ：４，５－ｂ’］ジチオフェン、４，４－ビス（２－エチルヘキシル）－２，６－ビス（トリメチルスタンナニル）－４Ｈ－シクロペンタ［２，１－ｂ：３，４－ｂ’］ジチオフェン、および４，７－ジブロモ－２，１，３－ベンゾチアジアゾールの間の重合

【００９８】

【化１２】



２，６－ビス（トリメチルスタンニル）－４，４－ビス－（２－エチルヘキシル）－４Ｈ－シロロ［３，２－ｂ：４，５－ｂ’］ジチオフェン（０．２７６６ｇ，０．３７１５ｍｍｏｌ）、４，４－ビス（２－エチルヘキシル）－２，６－ビス（トリメチル－スタンナニル）－４Ｈ－シクロペンタ［２，１－ｂ；３，４－ｂ’］ジチオフェン（０．１３５３ｇ，０．１８５８ｍｍｏｌ）、４，７－ジブロモ－２，１，３－ベンゾチアジアゾール（０．１５７５ｇ、０．５３５９ｍｍｏｌ）、トリス（ジベンジリデンアセトン）－ジパ

ラジウム（１４．７mg，１６．１μmol）、およびトリフェニルホスフィン（３３．７mg、０．１２９mmol）をトルエン（１００mL）中に溶解させた。その反応を１５分間にわたってアルゴンでパージし、１２０℃で４８時間にわたって加熱した。次いで、溶媒を真空下で除去し、残留物を熱ジクロロベンゼン（約１００mL）中に溶解させた。ジエチルジチオカルバミン酸三水和物の溶液（１７０mLの水中に６g）を加えた。その混合物を８０℃で２４時間にわたって撹拌した。有機層を分離し、水で洗浄し、メタノール（８００mL）中で沈殿させた後、固形物を濾過により収集して、ソックスレー抽出器内の円筒濾移動した。固形物をメタノールで２４時間、アセトンで２０時間、次いでジクロロメタンで４時間にわたって抽出した。それにより得られたポリマーを、次に熱１，２－ジクロロベンゼン（６０mL）中に溶解させ、メタノール（約７００mL）中で沈澱させた。ポリマーを青い固形物として濾過により収集した。この反応の収率は１２１mg（～４１％）であった。

【実施例４】

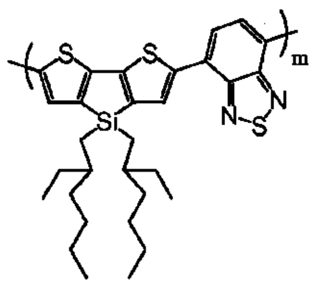
【００９９】

太陽電池の製作

下記式のポリマー：

【０１００】

【化１３】



（ポリマー１）と、上記実施例３に記載したポリマー（ポリマー２）とを用いて太陽電池を製作した。ポリマー１は、２種類のみコモノマー繰り返し単位が用いられたこと以外は、ポリマー２と同様の方法で調製した。太陽電池は、ヴァルトラウフ(Waldauf)ら、J.Appl.Phys. 99, 104503 2006に記載された方法に従って製作した。簡潔に述べると、ＩＴＯ被覆ガラス上において、ＴｉＯｘをＩＴＯの層の上に施して正孔ブロッキング層を形成した。オルトジクロロベンゼン中にポリマー１または２と、Ｃ６１－ＰＣＢＭとを入れた溶液を、前記正孔ブロッキング層上に７５°Ｃでブレードコートして、光活性層を形成した。次に前記光活性層上にＰＥＤＯＴ：ＰＳＳの混合物をコーティングして正孔注入層を形成した。前記正孔キャリア層上に１００nmのＡｇを蒸着して上部電極を形成することによって装置を完成させた。

【０１０１】

結果によれば、疑似ＡＭ１．５Ｇ照射（オリエル　ソーラー　シミュレータ(ORIEL Solar Simulator)）下で試験した場合、光活性層中にポリマー１を含有する太陽電池は、８．１mA．cm^{-2}のＪ$_{sc}$、５２０mVのＶ$_{oc}$、および０．３１の充填率を示した。全体効率は１．４％であると算定された。理論によって縛られることを望むものではないが、相対的に不十分な性能は、励起子解離および電荷輸送を妨げる光活性層の不十分なモルフォロジーに起因すると考えられる。

【０１０２】

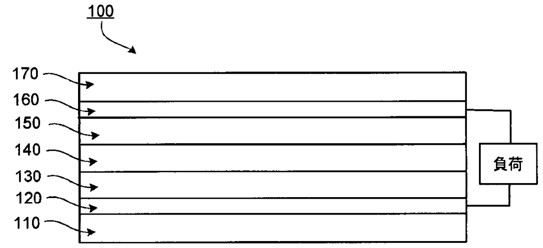
予想外なことに、同一の条件下で試験した場合、ポリマーを比較的低温（すなわち７５°Ｃ）でブレードコートした場合でさえ、光活性層中にポリマー２を含有する太陽電池がより良好な性能を示した。具体的には、結果によると、ポリマー２を含有する太陽電池は１５．１mA．cm^{-2}のＪ$_{sc}$、５７０mVのＶ$_{oc}$、および０．５７の充填率を示し

た。全体効率は約５％もの高さになると算定された。理論によって縛られることを望むものではないが、ポリマー２の有機溶媒中における改善された可溶性は、より良好なモルフォロジーを有する光活性層の形成を可能にし、それにより太陽電池の性能を著しく改善したものと考えられる。

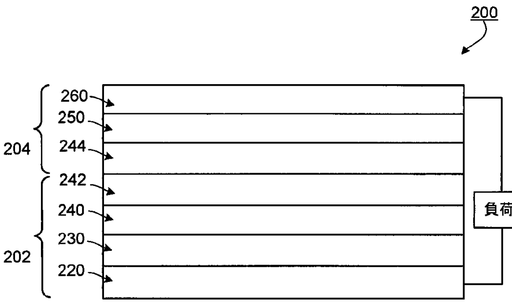
【０１０３】

他の実施形態は特許請求の範囲に存する。

【図１】



【図２】



【図３】

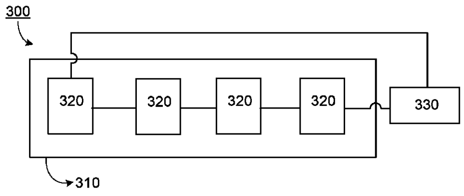


FIG. 3

【図４】

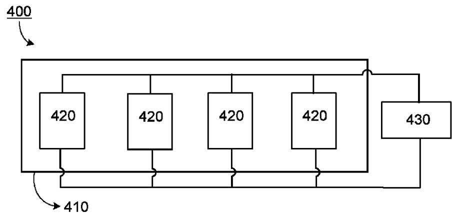


FIG. 4

フロントページの続き

(72)発明者　ウォラー、デイビッド
アメリカ合衆国　０２４２０　マサチューセッツ州　レキシントン　クーリッジ　アベニュー　３１

審査官　吉野　三寛

(56)参考文献　特表２０１０－５０７２３３（ＪＰ，Ａ）
特表２００９－５２１８１０（ＪＰ，Ａ）
特表２００９－５０６５１９（ＪＰ，Ａ）
特表２００９－５３３８７８（ＪＰ，Ａ）

(58)調査した分野(Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｈ０１Ｌ　　５１／４６